2005年6月29日（水）

# 数値解析講義　前期水曜3限
# 3年（2005）

（青柳は海外出張のため）代講　渡部 善隆

担当責任者: aoyagi@cc.kyushu-u.ac.jp

研究室：情報基盤センター

# 講義内容

{括弧}の項目はSkipまたは参考程度

１．超越方程式（非線形方程式）の解法

　１．１　２分法　→　演習

　１．２　{補間法}

　１．３　ニュートン法　→　演習

２．代数方程式の解法

　２．１　グラーフェの方法　→　（演習）

　２．２　{ベルヌーイの方法}

３．連立一次方程式の解法

　３．１　行列計算　→　演習

　３．２　ガウスの消去法　→　演習

　３．３　３重対角行列の場合の解法

　３．４　LU分解法　→　演習

講義vs演習スケジュールに余裕がある日を見つけて，「数値解析」を必要とする理学工学社会学？分野で活用されている計算科学の概論を紹介する（予定）．

３．５　特異値分解法

３．６　共役勾配法　→演習

３．７　反復法　→演習　3.7.1 ヤコビ法

３．７．２　ガウス･ザイデル法　　３．７．３　SOR法（参考）

# 4. 固有値と固有ベクトルの近似計算

{4．１　レバリエールの方法}→固有値問題の序

4．２　ヤコビの方法（対角行列への帰着）→演習

4．３　ギブンスの方法( ３重対角行列への帰着)

4．４　ハウスホルダー法(3重対角行列への帰着　6/29)

4．５　バイセクション法( ３重対角行列の固有値と固有ベクトルの計算)

# 5. ラグランジュの未定乗数法

# 6. 勾配法

６．１　最急降下法

６．２　最急降下加速法

６．３　ステップ幅の決め方

# 成績評価，その他

- 出席点５割＋前期末試験５割
- 講義ノートは，毎回配りますが
  もし欠席したら各自でDLしてください
  server-500.cc.kyushu-u.ac.jp
  （講義ノートはその週の金曜日１7時までには公開）
- 座席指定でお願いします
  ３０分後には座席表から出欠を取ります
- 研究室の電話は 092-642-3838
- メールは，aoyagi@cc.kyushu-u.ac.jp
  Subjectには，「数値解析」と記入
  してください

# ４．４　ハウスホルダー法

ギブンス法にならぶ三重対角化の代表的な方法で，演算回数が行列の次数(n)と明確に関係付けられる.

$$A : n \times n \text{ 対称行列} \xrightarrow{\text{変換}} \begin{pmatrix} * & * & & & & \\ * & * & * & & 0 & \\ & * & * & \ddots & & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & 0 & & \ddots & * & * \\ & & & & * & * \end{pmatrix}$$

3重対角行列

三重対角化のプロセスは固有値問題以外にも有効に使われ，「ハウスホルダー変換」とも呼ばれる.

まず，最初のステップ・・

相似変換 $B = P^{-1}AP$ を考える

$$B = \begin{pmatrix} * & * & \boxed{0 \quad \cdots \quad 0} \\ * & * & * & \cdots & * \\ 0 & * & * & \cdots & * \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & * & * & \cdots & * \end{pmatrix}$$

0となるようにする

変換行列に次の形を仮定すると

$$P = I - 2\mathbf{u}^t\mathbf{u}$$

$$\mathbf{u} = {}^t(u_1, u_2, \cdots, u_n) \quad : n\text{次元ベクトル}$$

$$\|\mathbf{u}\|_2^{\,2} = {}^t\mathbf{u}\mathbf{u} = \sum_{i=1}^{n} u_i^2 = 1 \quad : \text{正規化}$$

$P$ は対称な直交行列(基本直交行列)

$$ {}^tP = {}^t(I - 2\mathbf{u}\,{}^t\mathbf{u}) = {}^tI - 2\,{}^t(\mathbf{u}\,{}^t\mathbf{u}) = I - 2\mathbf{u}\,{}^t\mathbf{u} = P $$

$$ {}^tPP = PP = (I - 2\mathbf{u}\,{}^t\mathbf{u})(I - 2\mathbf{u}\,{}^t\mathbf{u}) $$

$$ = I - 2\mathbf{u}\,{}^t\mathbf{u} - 2\mathbf{u}\,{}^t\mathbf{u} + 4\mathbf{u}(\mathbf{u}\,{}^t\mathbf{u})\,{}^t\mathbf{u} = I $$

$$ P = {}^tP = P^{-1} $$

$P = P^{-1}$ は対称だから

$$ {}^tB = {}^t(P^{-1}AP) = {}^tPA\,{}^t(P^{-1}) = PAP^{-1} = P^{-1}AP = B $$

よって $B = P^{-1}AP$ も対称

$\mathbf{u}$ として

$$\mathbf{u} = \begin{pmatrix} 0 \\ * \\ \vdots \\ * \end{pmatrix}$$ 第1成分が0

の形のものを選ぶことができたと仮定すると,

このとき $P$ の形は,

$$P = P^{-1} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & * & \cdots & * \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & * & \cdots & * \end{pmatrix}$$

ここで，任意の行列 $G$ に対して

$$GP=\begin{pmatrix} g_{11} & g_{12} & \cdots & g_{1n} \\ g_{21} & g_{22} & \cdots & g_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ g_{n1} & g_{n2} & \cdots & g_{nn} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & * & \cdots & * \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & * & \cdots & * \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} g_{11} & * & \cdots & * \\ g_{21} & * & \cdots & * \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ g_{n1} & * & \cdots & * \end{pmatrix}$$

$GP$ の1列目は$G$ の1列目と同じとなることがわかる.

相似変換 $B=P^{-1}AP$ では

$B=(P^{-1}A)P$ の1列目は $P^{-1}A$の1列目と同じであるから,

$\mathbf{a}:A$の第1列目のベクトル

$\mathbf{b}:B$の第1列目のベクトル

とすると

$$P^{-1}\mathbf{a}=P\mathbf{a}=(I-2\mathbf{u}{}^{t}\mathbf{u})\mathbf{a}=\mathbf{b}$$

$$B=\begin{pmatrix} * & * & 0 & \cdots & 0 \\ * & * & * & \cdots & * \\ 0 & * & * & \cdots & * \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & * & * & \cdots & * \end{pmatrix}$$

となるための $\mathbf{b}$ の形は

$$\mathbf{b}=\begin{pmatrix} * \\ * \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} b_{11} \\ b_{21} \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix}$$

従って,

勝手な $\mathbf{a}={}^t\left(a_{11},a_{21},\cdots,a_{n1}\right)$ と上の形の $\mathbf{b}$ に対して

$$(I-2\mathbf{u}{}^t\mathbf{u})\mathbf{a}=\mathbf{b} \quad \text{かつ} \quad \mathbf{u}=\begin{pmatrix} 0 \\ * \\ \vdots \\ * \end{pmatrix}$$

となる $\mathbf{u}$ があればよい

$\|\mathbf{x}\|_2 = \|\mathbf{y}\|_2$ であるような

任意の $n$ 次元ベクトル $\mathbf{x}, \mathbf{y}$ に対して単位ベクトル

$$\mathbf{u} = \frac{\mathbf{x} - \mathbf{y}}{\|\mathbf{x} - \mathbf{y}\|_2} \qquad \|\mathbf{u}\|_2 = 1$$

は次を満たす

$$(I - 2\mathbf{u}^t\mathbf{u})\mathbf{x} = \mathbf{y}$$

【証明】

$${}^t\mathbf{x}\mathbf{x} = \|\mathbf{x}\|_2{}^2 = \|\mathbf{y}\|_2{}^2 = {}^t\mathbf{y}\mathbf{y}$$ と

$${}^t\mathbf{x}\mathbf{y} = \sum_{i=1}^{n} x_i y_i = {}^t\mathbf{y}\mathbf{x}$$ を用いると

$$
\begin{aligned}
(I - 2\mathbf{u}\,{}^t\mathbf{u})\mathbf{x} &= \left(I - \frac{2(\mathbf{x}-\mathbf{y})\,{}^t(\mathbf{x}-\mathbf{y})}{{}^t(\mathbf{x}-\mathbf{y})(\mathbf{x}-\mathbf{y})}\right)\mathbf{x} \\
&= \mathbf{x} - \frac{2(\mathbf{x}-\mathbf{y})({}^t\mathbf{x}\mathbf{x} - {}^t\mathbf{y}\mathbf{x})}{{}^t\mathbf{x}\mathbf{x} - {}^t\mathbf{y}\mathbf{x} - {}^t\mathbf{x}\mathbf{y} + {}^t\mathbf{y}\mathbf{y}} \\
&= \mathbf{x} - \frac{2({}^t\mathbf{x}\mathbf{x} - {}^t\mathbf{y}\mathbf{x})}{2({}^t\mathbf{x}\mathbf{x} - {}^t\mathbf{y}\mathbf{x})}\left(\mathbf{x}-\mathbf{y}\right) \\
&= \mathbf{y}
\end{aligned}
$$

$\mathbf{b} = {}^t\left(b_{11}, b_{21}, 0, \cdots, 0\right)$ において

$b_{11} = a_{11}$、$b_{21}{}^2 = \sum_{j=2}^{n} a_{j1}{}^2$ とすれば

$$\|\mathbf{a}\|_2{}^2 = \sum_{j=1}^{n} a_{j1}{}^2 = b_{11}{}^2 + b_{21}{}^2 = \|\mathbf{b}\|_2{}^2$$

が満たされるので

$$\mathbf{u} = \frac{\mathbf{a} - \mathbf{b}}{\|\mathbf{a} - \mathbf{b}\|_2}$$

とすれば

$$\mathbf{u} = \begin{pmatrix} 0 \\ * \\ \vdots \\ * \end{pmatrix} \quad \text{かつ} \quad (I - 2\mathbf{u}{}^t\mathbf{u})\mathbf{a} = \mathbf{b}$$

$b_{11}, b_{21}$を上のように選ぶと

$$\mathbf{w} \equiv \mathbf{a} - \mathbf{b} = \begin{pmatrix} 0 \\ a_{21} + s \\ a_{31} \\ \vdots \\ a_{n1} \end{pmatrix} \qquad s^2 = {b_{21}}^2 = \sum_{j=2}^{n} {a_{j1}}^2$$

$s$ の符号は$a_{21}$と同符合になるようにとる
(桁落ちを避けるため)

$$\|\mathbf{w}\|_2^{\ 2} = \|\mathbf{a} - \mathbf{b}\|_2^{\ 2} = 2s^2 + 2a_{21}s$$

$\mathbf{w}$を用いると$P$は次のように表せる

$$P = I - 2\mathbf{u}^t\mathbf{u} = I - \alpha\mathbf{w}^t\mathbf{w} \qquad \alpha = \frac{1}{s^2 + |a_{21}s|}$$

$B = P^{-1}AP$ は次のようにして効率的に計算できる

$$\begin{aligned} B &= P^{-1}AP \\ &= \left(I - \alpha\mathbf{w}^t\mathbf{w}\right)A\left(I - \alpha\mathbf{w}^t\mathbf{w}\right) \\ &= A - \alpha\mathbf{w}^t\mathbf{w}A - \alpha A\mathbf{w}^t\mathbf{w} + \alpha^2\mathbf{w}^t\mathbf{w}A\mathbf{w}^t\mathbf{w} \\ &= A - \left(\mathbf{w}^t\mathbf{q} + \mathbf{q}^t\mathbf{w}\right) \end{aligned}$$

ここで$\mathbf{p}$、$\mathbf{q}$はそれぞれ

$$\mathbf{p} = \alpha A\mathbf{w}$$

$$\mathbf{q} = \mathbf{p} - \frac{\alpha}{2}\mathbf{w}^t\mathbf{p}\mathbf{w}$$

以上から$B = P^{-1}AP$ の1列目は $\mathbf{b} = \begin{pmatrix} * \\ * \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix}$ の形になり

$B$ は対称だから次の形になる

$$B = \begin{pmatrix} * & * & 0 & \cdots & 0 \\ * & * & * & \cdots & * \\ 0 & * & * & \cdots & * \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & * & * & \cdots & * \end{pmatrix}$$

$A_2 \equiv B$ と書くことにしてさらに変換することを考える

$$A_3 = P_2^{-1} A_2 P_2$$

$A_2$ の要素を $a_{ij}^{(2)}$ とすると

$$A_2 = \begin{pmatrix} a_{11}^{(2)} & a_{12}^{(2)} & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ a_{21}^{(2)} & a_{22}^{(2)} & a_{23}^{(2)} & a_{24}^{(2)} & \cdots & a_{2n}^{(2)} \\ 0 & a_{32}^{(2)} & a_{33}^{(2)} & a_{34}^{(2)} & \cdots & a_{3n}^{(2)} \\ 0 & a_{42}^{(2)} & a_{43}^{(2)} & \ddots & & \vdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & & \ddots & \vdots \\ 0 & a_{n2}^{(2)} & a_{n3}^{(2)} & \cdots & \cdots & a_{11}^{(2)} \end{pmatrix}$$

この部分はそのままにして

ここを0にしたい

そのための変換行列 $P_2 = I - 2\mathbf{u}_2{}^t\mathbf{u}_2$ の形は

$$P_2 = P_2^{-1} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & * & \cdots & * \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & * & \cdots & * \end{pmatrix}$$

したがって $\mathbf{u}_2$ の形は

$$\mathbf{u}_2 = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ * \\ \vdots \\ * \end{pmatrix}$$

第1、第2成分が0

$A_2, A_3$ の第2列目のベクトルを $\mathbf{a}_2^{(2)}, \mathbf{a}_2^{(3)}$ とすると

$$\left\|\mathbf{a}_2^{(2)}\right\|_2 = \left\|\mathbf{a}_2^{(3)}\right\|_2 \quad \text{かつ} \quad \mathbf{u}_2 = \frac{\mathbf{a}_2^{(2)} - \mathbf{a}_2^{(3)}}{\left\|\mathbf{a}_2^{(2)} - \mathbf{a}_2^{(3)}\right\|_2}$$

が

$$\mathbf{u}_2 = {}^t\left(0, 0, *, \cdots, *\right)$$

の形になるようにしたい

そのためには

$$\mathbf{a}_2^{(3)} = {}^t\left(a_{12}^{(3)}, a_{22}^{(3)}, a_{32}^{(3)}, 0, \cdots, 0\right)$$

において

$$a_{12}^{(3)} = a_{12}^{(2)}, a_{22}^{(3)} = a_{22}^{(2)}, a_{32}^{(3)} = -s_2, \quad s_2 = \pm\sqrt{\sum_{j=3}^{n}\left(a_{j2}^{(2)}\right)^2}$$

とすればよい

$\left(a_{32}^{(2)}\right.$ と同符合になるようにする$\left.\right)$

そのとき

$$\mathbf{w}_2 \equiv \mathbf{a}_2^{(2)} - \mathbf{a}_2^{(3)} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ a_{32}^{(2)} + s_2 \\ a_{42}^{(2)} \\ \vdots \\ a_{n2}^{(2)} \end{pmatrix} \qquad s_2^2 = \sum_{j=3}^{n} \left( a_{j2}^{(2)} \right)^2$$

$$\left\| \mathbf{w}_2 \right\|_2^{\ 2} = \left\| \mathbf{a}_2^{(2)} - \mathbf{a}_3^{(3)} \right\|_2^{\ 2} = 2 s_2^2 + 2 \left| a_{32}^{(2)} s_2 \right|$$

$$P_2 = I - 2 \mathbf{u}_2{}^t \mathbf{u}_2 = I - \alpha_2 \mathbf{w}_2{}^t \mathbf{w}_2 \qquad \alpha_2 = \frac{1}{s_2^2 + \left| a_{32}^{(2)} s_2 \right|}$$

等となる

変換後の $A_3$ は下のような形になる

$$A_3 = P_2^{-1} A_2 P_2 = \begin{pmatrix} * & * & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ * & * & * & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & * & * & * & \cdots & * \\ 0 & 0 & * & * & \cdots & * \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & * & * & \cdots & * \end{pmatrix}$$

以下同様の変換を繰り返すと

$$A_{k+1} = P_k^{-1} A_k P_k$$

$$P_k = I - 2\mathbf{u}_k {}^t\mathbf{u}_k = I - \alpha_k \mathbf{w}_k {}^t\mathbf{w}_k \qquad \alpha_k = \frac{1}{s_k^2 + \left| a_{k+1,k}^{(k)} s_k \right|}$$

$$\mathbf{w}_k \equiv \mathbf{a}_k^{(k)} - \mathbf{a}_k^{(k+1)} = \begin{pmatrix} 0 \\ \vdots \\ 0 \\ a_{k+1,k}^{(k)} + s_k \\ a_{k+2,k}^{(k)} \\ \vdots \\ a_{nk}^{(k)} \end{pmatrix} \qquad s_k^2 = \sum_{j=k+1}^{n} \left( a_{jk}^{(k)} \right)^2$$

$n-2$ 回の変換で3重対角行列に変換される